



TITLE:

ディスロケーションの非線形動力 学-「ハード」マテリアルにおける ソフトなダイナミクス

AUTHOR(S):

波多野, 恭弘

CITATION:

波多野, 恭弘. ディスロケーションの非線形動力学-「ハード」マテリアルにおけるソフトなダイナミクス. 物性研究 2005, 84(1): 123-155

ISSUE DATE:

2005-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110155>

RIGHT:

ディスロケーションの非線形動力学¹

—「ハード」マテリアルにおけるソフトなダイナミクス

東北大学金属材料研究所 波多野恭弘²

(2005 年 4 月 7 日受理)

結晶性物質が塑性変形する際の微視的機構である dislocation のダイナミクスについて解説する。dislocation とは「線状の格子欠陥」であり、また「すべった面とまだすべっていない面とを分ける界面」でもあるので、物理の言葉で言えば欠陥ダイナミクスであり、界面ダイナミクスである。そのようにみた場合、dislocation ダイナミクスは二つの特異性をもつ。すなわち、ひずみ場を介した長距離相互作用と、格子に起因する離散性である。dislocation 理論は 1945 年に Orowan らにより提唱されて以来古い歴史を持ち、とくに材料工学の文脈で多数の教科書やモノグラフが出ているが、非線形動力学という観点からはほとんど論じられていないようにみえる。この小論では dislocation 理論を非線形動力学の観点から紹介する。ただし筆者自身非平衡物理の出身であって材料科学の専門教育は受けていないので、dislocation 理論の包括的な入門を書くことなどは不可能である。そのような知識の網羅は材料科学の教科書 [1, 2, 3] に譲り、ここでは「古い題材に対する新たな見方」の提供を試みる。この小論が物理屋に dislocation への興味を喚起するきっかけとなれば幸いである。

1 導入：その柔らかさに用がある

1.1 柔らかい動力学

まず（「物性研究」誌の読者が主に出席しているであろう）物理学会のいわゆる「領域 1 1」「領域 1 2」のキーワードを拾ってみる：ガラス、粉体、過冷却液体、たんぱく質の折り畳みから細胞分化にゲーム理論、学会を支配するメタダイナミクスは生物を含んだいわゆる柔らかいモノのダイナミクスであり、巷ではソフトマテリアルの物理と総称されている。

では、ソフトマテリアル物理のどの辺が面白いのだろうか？もちろん人によって様々な意識があるだろうが、そこが「柔らかいダイナミクス」の宝庫であるからと筆者は理解し

¹ 本稿は、編集部の方から特にお願いして執筆していただいた記事である。

² 2005 年 5 月より東京大学地震研究所に異動。メールアドレスは原稿執筆時点では未定ですので、s2barcelona@yahoo.co.jp をお願いします。

ている。ここで、柔らかい「モノ」でなく、柔らかい「ダイナミクス」であることに注意されたい。ここで言いたいことは、高分子系や生物などを支配する柔らかいダイナミクスは別に柔らかいモノに固有のものではないということである。モノの表層にとらわれてはならない。物理学は扱う「モノ」に規定される学問では断じてない。

では、モノに規定されない「柔らかいダイナミクス」とはなんだろうか？ 筆者は以下のように理解している。もし「硬いダイナミクス」が定義できるとすれば、それはフーリエ変換に代表されるモード分解可能な現象であろう。周波数・波数の大きさごとに運動が分解され、それぞれのスケールがほとんど独立に存在する。時間はその表式に入ってこそのものの、ほぼ独立な調和振動子の集合（からの摂動）というその描像はどこまでも静的である。

そのような「線形系からの摂動を高次まで求めれば原理的にはいくらかでも精密な計算が出来る」という硬いピクチャーを破壊する力学はカオス（非線形動力学）であった。そこでは各モードはもはや独立に存在しえず、異なったスケールのダイナミクスが相互に強く干渉しあう。カオスの再発見から、自然現象に対する非線形動力学的アプローチの発展は多岐に及んだ。すなわち、BZ 反応などの時空パターンに動機付けられたオレゴネータやブラッセレータ、Kuramoto-Sivashinski 方程式に代表される時空カオス、日本発の一大流行である結合振動子系・CML・GCM の抽象的モデル … などなど。これら力学系的モデルが統計力学的な解析と縮約理論を主な武器として長足の進歩を遂げたのは周知の通りであり、現在では生物・社会・経済など従来の物理学が扱わなかった系に対する「力学系のアプローチ」なる一大分野を形成している。そしてそれらの研究は、一部に強固な批判を呼び起こしつつも³、力学系による記述の万能性を幻想させるほどに強力である。

結合振動子系や CML などの抽象的モデル研究が成立し得た理由は、まさに非線形動力学がモノではなくコトに対する処方であり、どんなモノに対しても宿っている普遍性があるからである。ゆえに、これまで述べてきたようなスケールの不可分性という意味での柔らかいダイナミクスならば、当然ながらその程度のものは金属などの「硬い」物質にも宿っている⁴。その辺の事情を見て頂くのが本稿の目的である。

1.2 柔らかい統計力学？

さて、以上はダイナミクスにおける柔らかさを述べたのであるが、統計力学においても同様の議論で柔らかいものと硬いものとに分類できるかもしれない。これはあくまでイメージの問題なので筆者の独断を述べさせていただくが、「硬い統計力学」とは、中心極限定理に代表される正規分布の特性であろう。平均値と分散という二つの量（相関関数な

³ その一部は計算機の多用に対するお門違いな批判と言えなくもないが。

⁴ しかし鉄鋼と聞いて斜陽産業と思ひ浮かべるように、「金属物理」などというとすでに終わった分野という印象を持たれる方も多いかもしい（実際筆者自身もそうであった）。この小論でそのイメージが少しでも払拭できればと思う。

ら二点相関関数だけ) から統計量が全て計算できてしまう枠組は、統計則なので静的という言葉はそぐわないとしても、やはり「硬い」イメージを与える。しかし要素数が多くて揺らぎが小さければほとんどの場合これで話が済んでしまうのであって、たとえば原子分子を構成要素としてマクロな現象を見る場合にこのような理想化が可能である。これは構成要素のダイナミクスと観測量の間のスケール分離による理想化である。この「スケールの分離」こそが、平衡非平衡問わず現在確立している統計力学の暗黙の大前提となっていると言ってよい⁵。

だからもし柔らかい統計力学があるとすれば、それはスケール分離不可能な現象—すなわち構成要素と観測量との時空スケールが近いような現象—を扱う統計力学であろう。これは何も特別な現象ではなく、たとえば粉体の運動のような身近な現象を考えてみればすぐ直面することである。乱流の統計則もそうだ。もっと過激に言ってしまうと、構成要素が原子分子でなければすぐに中心極限定理は無効となる。熱運動がほとんど効かないメゾ・マクロ構成要素のダイナミクスからその集団的振る舞いを記述する統計力学は、広義には非平衡統計力学であるが、その構築は狭義の非平衡統計力学よりはるかに困難であることが予想される。理由は平衡状態という reference state の不在であり、輸送現象において成功を収めてきた「平衡からのずれに対する摂動」というピクチャーが使えないからである。平衡状態が存在しない（もしくはトリビアル過ぎて非平衡へと拡張できない）のであるから、必然的にその枠組は平衡統計力学とは全く違うものとなることが予想される。だが、もちろんまだそのような枠組は姿を現してはいない⁶。現段階では、理論的な見方を忘れずに、具体的なモデル系との格闘を通じて模索していくことが大切であろう。

さて、金属の塑性変形に話を戻すとその主役は原子分子ではなく、実は格子欠陥であり、格子欠陥動力学の集団的性質として捉えたほうがマクロな塑性変形の挙動はすっきりと説明できることが多い。よって格子欠陥の動力学を出発点としてマクロな塑性変形の現象論を再現する理論が塑性変形の理論であり、物理でいえば統計力学に対応する。ただ、既存の統計理論はまだ満足のいく段階ではない。よってここではそれらは紹介せず、あくまで格子欠陥の生のダイナミクスを紹介するという目的のもとにこの小論は書かれている。そしてそれら格子欠陥が多体系をなしたときの集団的・統計的性質を扱う理論を読者に想像して（そして願わくば研究対象にして）もらう、という狙いである。ではさっそく以下から塑性変形を担う格子欠陥としての dislocation の説明に入る。

⁵たとえば局所平衡仮定やボルツマン方程式による記述などの根拠を考えてみればよい。

⁶Tsallis 統計などはその有力候補とされているのかもしれないが、計算(予言)能力という点で筆者には物足りなく思われる。一方 Jou らによる Extended Irreversible Thermodynamics や大野・佐々・田崎などによる Steady State Thermodynamics は、言うなれば熱力学(現象論)サイドからの挑戦であり、平衡熱力学を内包する綺麗な枠組を提供している。が、非平衡効果に関して平衡からのずれを扱うという見方からは依然として脱していない。

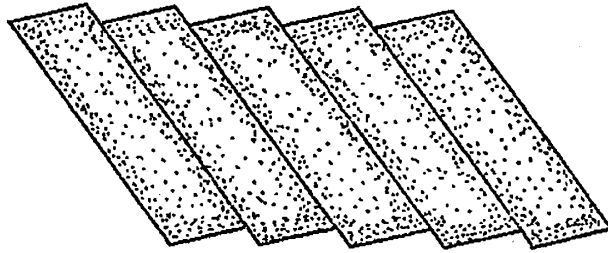


図 1: 「すべり」の模式図。トランプの束を滑らせるイメージ。トランプの一枚一枚は原子が最も稠密に詰まった面である。

2 dislocation: 塑性変形を担うもの

2.1 塑性変形の微視的機構

塑性変形はミクロに見れば「結晶構造の組み替え」であるが、その組み替わり方には様々な方式があり、実際に起こる機構は結晶構造や応力や温度などさまざまな要因によって決まる⁷。ここでは数ある変形機構のうちもっとも主要な機構である「すべり」を論じる。主要な機構と言った意味は、「たいていの場合は微視的機構としてすべりだけを考えればマクロな塑性変形の挙動を説明できる」という意味である⁸。

「すべり」とはある定まった結晶面—たいていの場合原子がもっとも密に詰まっている面(最密面)—について、それらの面どうしが相対的に滑る運動である。一組のトランプを左右に滑らせるイメージでよい(図 2.1 を参照)。実際単結晶を塑性変形させるとそのような模様(ステップ)が表面に現れる。そのように原子面同士が相対的に滑るためにはせん断応力が必要だが、実際問題どの程度の応力が必要になるのだろうか。ためしに二つの原子面間の接触モデルとして Frenkel-Kontorova モデル(図 2.1)を採用し、これらの面を一原子間距離だけすべらせるのに必要な応力を計算してみるととんでもなく大きな値が得られる。以下、簡単に説明しよう。

ポテンシャルの形を $A \sin(2\pi x/b)$ と書くと、この山を乗り越えさせるのに一原子あたり $2\pi A/b$ 以上の力が必要となる。ここで b は最近接原子間距離である。力を応力に直すには面密度 $2/\sqrt{3}b^2$ をかければよいから⁹、すべりに必要な応力は

$$\frac{4\pi A}{\sqrt{3}b^3} \quad (1)$$

⁷例えば原子拡散に支配されるクリープもそのひとつであるが、ここではクリープについては触れられない。これはひとえに筆者の勉強不足による。よい解説として、たとえば [2] の第 7-9 章があげられる(しかし残念ながら絶版である)。拡散に起因するゆえ、それらは必然的に融点に近い高温で重要になるゆっくりとした変形であり、「力を加えたらぐにゃっと変形した」というピクチャーからはだいぶ外れる現象である。

⁸もちろん例外は多数ある。たとえば双晶変形など(bcc 結晶を低温で高速変形させた際などに起こる)。

⁹最密面の原子は一辺の長さが b の三角格子を組んでいる。その正三角形ひとつに $1/2$ 個の原子が入っている。

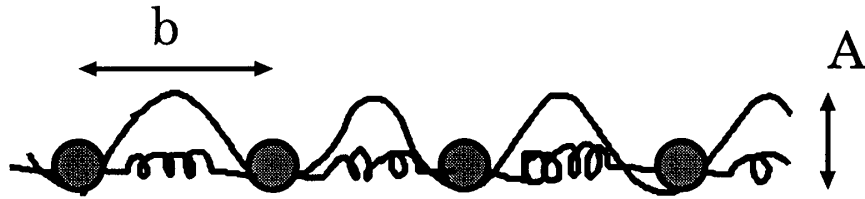


図 2: Frenkel-Kontorova モデルの模式図。

と分かる。一方で、「ポテンシャルの高さ」 A のマクロな物理的意味は微小変形を考えることによって剛性率に結び付けられる。微小変位に対するポテンシャルは調和型 $A[1 - (2\pi)^2 x^2 / 2b^2]$ と書けるから、一原子あたり働く力 F は $F = A(2\pi)^2 x / b^2$ となる。ここで x をひずみ ϵ に直すと $\epsilon = x/b$ だから、 $F = A(2\pi)^2 \epsilon / b$ とかける。これは剛性率 G を用いて表すと $G\epsilon\sqrt{3}b^2/2$ なので、 $A = G\sqrt{3}b^3/8\pi^2$ 。これを応力の値 (1) に代入して、結局すべりに必要な応力は

$$(\text{すべりに必要な応力}) = \frac{G}{2\pi} \quad (2)$$

と見積もれる。このようなわけで、すべりに必要な応力は剛性率の数分の 1 程度という結果が得られた。

この乱暴な見積もりを実験と比較してみよう。以下の表はいくつかの金属について実験で得られた剛性率と降伏応力である。この表を見れば分かるように、降伏応力は剛性率のほぼ 1 万分の 1 程度である。

物質	剛性率 (GPa)	降伏応力 (MPa)
銅	45	1
金	27.5	1
ニッケル	76.5	6
アルミ	26.5	0.5

表 1: 代表的な fcc 金属についての剛性率と降伏応力の関係。単位の違いに注意。

では、先に Frenkel-Kontorova モデルで論じた結晶面のすべりは何がいけなかったのだろうか。実は、これはモデルの単純さに起因するものではない。実際に三次元で完全結晶を組んで分子動力学計算をしてみると、すべりが起こる応力は剛性率の数分の 1 程度となり、単純な Frenkel-Kontorova モデルが正鵠を射ていることがわかる。完全結晶について上記モデルが正しいのならば、実験との乖離は格子欠陥が原因であるに違いない。すべりを担う (助ける) 格子欠陥こそが dislocation である。

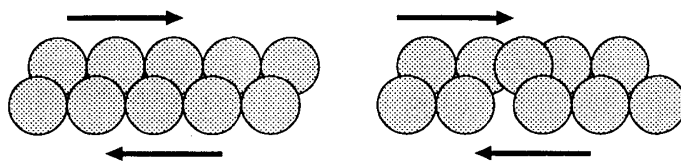


図 3: dislocation = 「原子のすべりにともなうしわ」

2.2 dislocation とは何か

2.2.1 1次元界面としての線状格子欠陥

”dislocation”とは、液晶の対流パターンや超伝導の vortex ダイナミクスなど、欠陥ダイナミクスに知識のある人には馴染みのある言葉であるが、この小論はそうでない人を対象としているから、まずは dislocation から説明をしなければならない。dislocation は日本語では「転位」などと訳されているが、要は原子位置のずれであり、格子欠陥である。

再びメタファーとしての Frenkel-Kontrova モデルに戻って考える。先ほどは全ての原子が一様にすべるとして、必要な応力を計算した。だが直観的に分かるように、変化（すべり）の経路としてはこれはエネルギー的に最も困難な経路であり、実ははるかに楽な経路が存在する。それは原子一つずつを順番に移していくやり方である。すなわち

1. 一つの原子をどちらか次の谷へずらす。
2. 以前からその谷にあった原子を次の谷へ移す。

というプロセスの繰り返しである。この過程で現れる「ひとつの谷に二つ原子が存在している欠陥」が dislocation である (図 2.2.1)。見方を変えれば、dislocation とは「すべった部分と未だすべっていない部分との境界」であるとも言える。そして dislocation はもちろん上記のように端 (表面) から導入できるが、実はそのような欠陥は結晶中に最初から多数含まれている。¹⁰

次に dislocation の次元を確認する。これまで原子面接触のメタファーとして見てきた一次元 Frenkel-Kontorova モデルは 2 次元結晶のすべりに対応していた (すべり面＝一次元原子列)。そして 2 次元結晶における dislocation は点欠陥である。なぜなら dislocation はすべった領域と未だすべっていない領域との境界であり、線の境界は点だからである。よって 3 次元結晶の dislocation は線欠陥であり、滑った面とまだ滑っていない面との「境界線」である。

¹⁰液体から固化する際にどのようにして欠陥を含むようになるのかという、固化の際の defect 形成ダイナミクスは興味深い問題である。たとえば dislocation を中心としてらせん状に結晶成長が進むダイナミクスは有名である。(そのようにして出来た微小結晶は中心軸に dislocation を一本だけ含んだ細長い結晶になるので whisker crystal と呼ばれる)。

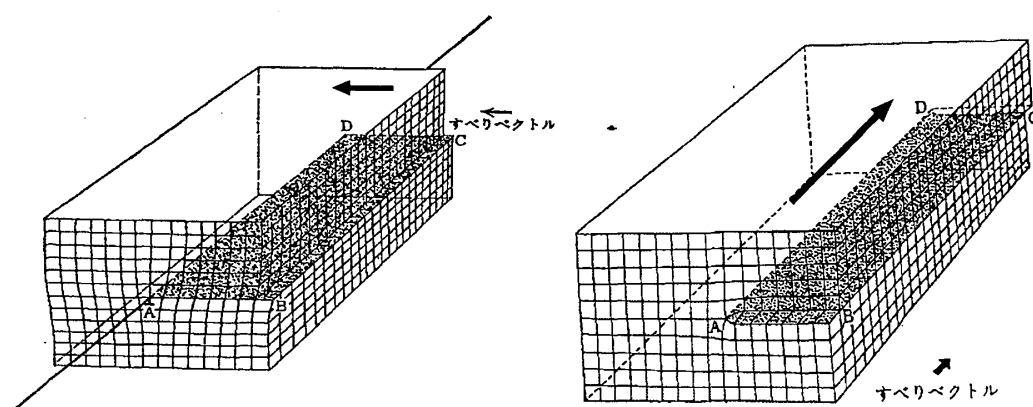


図 4: dislocation の概念図。それぞれ edge dislocation (左), screw dislocation (右)。結晶をぐっと押し込むことによって原子面の食い違いが出来るが、押し込む方向と出来た欠陥のなす角度によって弾性論的な性質が変わる。

2.2.2 burgers vector

さて、dislocation が滑った領域と滑ってない領域との境界であるからには、それが「どのような滑りなのか」が dislocation の特性にとって本質的である。すべりの種類は方向と大きさで一義で決まる。つまりベクトルである。そこで個々の原子がすべるベクトルを burgers vector と呼び、通常 \mathbf{b} であらわす。そして当然ながらわざわざ dislocation に注目するからには個々の原子の動きにはもはや注目しないので、burgers vector を dislocation に付随する量として考える。ここで注意すべきことは dislocation が進む方向と burgers vector とは全く関係ないということである。dislocation が進む方向は「すべりが伝播していく方向」であり、個々の原子がどう滑るかには無関係である。つまり burgers vector と dislocation の速度ベクトルとは完全に独立であり、任意の角度を取りうる。とくに dislocation の速度ベクトルが burgers vector と垂直な場合その dislocation を edge dislocation と呼び、平行な場合は screw dislocation と呼ぶ。この二つの特別な場合はそれぞれ異なる特徴を持つ。以下でその特徴を簡単に述べる。

2.2.3 edge dislocation

すべりの方向 (burgers vector) と、すべりが伝播する方向 (dislocation の速度ベクトル) とが同じという edge dislocation は、縦波を思わせる。縦波は疎密波であり、実際 edge dislocation はその周囲に密度の変化 (= ひずみで言えば膨張成分) を伴う。edge dislocation 周りのひずみ成分の詳細は教科書に譲るとして、ここでは面をすべらせるときに生じる「しわ」のようなイメージを持っていれば十分である。

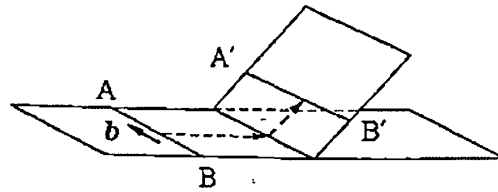


図 5: screw dislocation は別のすべり面へ移ることができる。これを交差すべりと呼ぶ。

2.2.4 screw dislocation：交差すべりを担うもの

screw dislocation は edge dislocation とは反対で、横波のようなものである（密度変化を伴わない）。周囲のひずみ成分は純粹に shear 成分のみである。そして screw dislocation には非常に特別な性質がある。すなわち、異なるすべり面へと移れるのである¹¹。あとで見るように、この性質はとくに dislocation と不純物の相互作用の際に重要になってくる。

2.2.5 dislocation 周囲のひずみ場：線張力と自己相互作用

edge dislocation と screw dislocation の違いのところでも述べたように、dislocation は変形に関係した格子欠陥であるからその周囲には大きいひずみ場が存在する。これらのエネルギーは単位長さあたりのエネルギーであり、dislocation のエネルギーは長さに比例する。よって曲がっている dislocation にはまっすぐになろうとする力が働く（線張力を持つ）。これらは $1/r$ で落ちる長距離力であり、dislocation どうしはこのひずみ場を介して相互作用する。また重要なことは、このひずみ場は自分自身にも作用するということである（自己相互作用）。連続体的な見方では、dislocation は「長距離相互作用する、線張力を持った紐」のダイナミクスを示す。

2.2.6 界面ダイナミクスとしての dislocation 動力学

ここまで列挙してくると dislocation は何やら高分子系めいてくるが、決定的に異なる点は運動の可能な領域が離散的ということである。すなわち、dislocation の運動は特定の種類のすべり面に拘束されている。（もちろんこれは運動が 2 次元的ということの意味しない。前述した「交差すべり」によって元のすべり面と交差する別のすべり面に飛び移れるからである）。

¹¹ 塑性変形の際にすべる面は最密面であるが、最密面はひとつではない。たとえば fcc 結晶では 4 つの異なる法線ベクトルに対応する最密面がある。マクロに印加されているせん断応力は面によって異なり、せん断応力が最大になる面がすべるのだが、ある程度変形が進むと 2 番目に強く応力がかかっている面もすべり出すようになる。

また、本論で詳細には触れないが接触型（短距離型）の相互作用もある。dislocation どうしは互いのすべり面が交差したところで出会うので、その形状から dislocation の「切り合い」と呼ばれる。このような接触型相互作用は dislocation の定性的性質 (burgers vector など) を変えるため、「反応」などとも呼ばれる。「反応」の性質は原子の離散性がもろに効くため、連続体的取り扱いの範囲では閉じない。単純に考えると、二つの dislocation が出会った場所の原子はそれぞれのバーガースベクトルを合成した方向に動こうとする。もし各々のすべりを合成したすべりが可能ならば、合成されたすべりを表す dislocation が進んでいくわけだが、すべりはそうそう勝手な方向が許されるわけでもない。もし無理な合成ならば dislocation はそれ以上進めなくなり停止する¹²。

また dislocation どうしの接触相互作用だけではなく、格子間原子や空孔の集合体などの他格子欠陥との接触型相互作用があるが、これらについても連続体的手法では取り扱えない（結晶の離散性を明示的に考えなくてはならない）。これらの事実は計算機実験も含めた dislocation 多体系の解析を著しく困難にしている要因であるが、dislocation 多体系モデルについては理論、シミュレーションともにまだ満足のいく研究はないため、本論では多体系についてはごく簡単にしか紹介できない。

さて、以上見てきた dislocation の（界面ダイナミクスとしての）特質を箇条書きにして復習しよう。

1. dislocation は最密面 (すべり面) どうしの相対すべり運動における、「すべった面」と「まだすべってない面」を分ける一次元界面である。
2. ひずみに起因する弾性エネルギーは dislocation の長さに比例するので、線張力と解釈される。
3. 常に一定の平面を動くわけではなく、「交差すべり」によりときたま別の平面へジャンプする。すなわち dislocation は 3 次元に離散的に分布した平面内を飛び回る線である。
4. 他の格子欠陥 (格子間原子、空孔、他の dislocation) と接触相互作用する。この相互作用を決定するには格子構造の詳細をあらわに考えなくてはならない。
5. 自身の作り出す弾性ひずみを介して他の格子欠陥や自分自身と相互作用をする。そしてその力は $1/r$ で減衰する長距離力である。

実は要素 1, 2 だけを考えれば、実は dislocation のダイナミクスは界面成長の分野で有名な Kardar-Parisi-Zhang(KPZ) 方程式で記述される [4]。実際あまり曲がりくねらない dislocation 単体のダイナミクスでは、自己相互作用は無視できる。この状況は dislocation

¹²これは加工硬化に対して重要な役割を果たす。

がほとんど直線形状を保ったまま一様に動いていく状況に対応している。だが、もちろんそのような状況は理想化のしすぎであり、現実にはほとんど使えない。

たとえば、まず空間内に分散する不純物の影響がある。これは quenched noise を入れた KPZ 方程式で記述できるようにも思えるが、不純物に対する引っ掛かりによって dislocation は曲がりくねる。そうすると長距離自己相互作用が無視できなくなるので、一本の dislocation ダイナミクスですら KPZ 方程式の範疇をはるかに超えていると言ってよい。

また、要素 3, 4 においては格子構造に起因する離散性が本質的に重要である。dislocation は本質的に格子欠陥であり、この格子構造に起因する離散性が長波長ダイナミクスにも効いてくる。そして要素 5 の長距離相互作用によって計算コストは飛躍的に上昇するのでシミュレーションも困難となる。まとめると、dislocation 動力学は、長距離相互作用と格子の離散性が効く新たな界面ダイナミクスと言えるのである。

2.3 dislocation 動力学の理解へ向けて

ただし当然ながらこれら 5 つの要素を全て考慮に入れたモデルを作るのは容易ではないし、実際問題そのような試みは現在まだ端緒についたばかりである。その理由は近距離相互作用 (dislocation どうしの「切り合い」や不純物との相互作用) 自体にまだ分かっていない部分が多いからであり、連続体的モデルを構成する前に、このような格子の離散性が効く現象の詳細を知らなければならない。つまりマクロ多体系モデルに取り込むべきミクロ素過程を一つ一つ詰めていくという段階である。そのような、やるべきことを地道に詰めていくしかないという信念で、ここから dislocation の運動の微視的過程に焦点を当てていくのだが、実はそこで分かるように dislocation の動力学を面白くしている要因—長距離自己相互作用や他欠陥との接触相互作用—は、ミクロ素過程それ自体にも含まれており、前述したマクロモデルの困難「非線形かつ結晶の離散性が効く」は素過程自体に現れるのである。以下では dislocation と他の格子欠陥の相互作用の動力学を中心に、そのあたりの事情を見ていただきたい。

3 dislocation の運動論

3.1 相互作用のない場合

まずはおおまかな感じをつかんでいただく目的で、dislocation の運動についての基礎的な事柄を解説する。物理の常道 (?) として、dislocation 単体 (他の格子欠陥との相互作用が無い場合) のダイナミクスから入ろう。

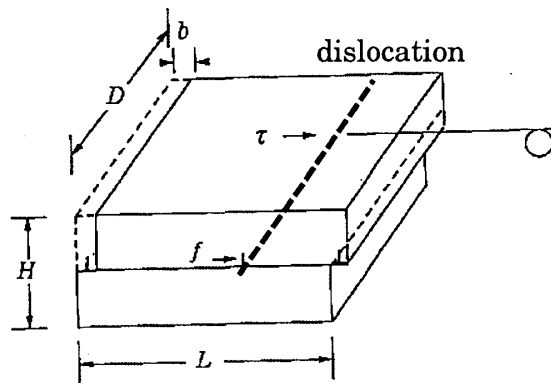


図 6: dislocation を一本含む小体積。

3.1.1 ひずみ速度と dislocation 速度の関係

相互作用を考えなければ一体問題であるから、結晶中に dislocation が一本含まれているような状況を考える (図 3.1.1)。この小体積は DHL であり、そこに長さ D の dislocation が含まれているので、dislocation 密度は $1/HL$ である (単位が面積の逆数であることに注意)。この密度を Λ で表す。この系に充分強いせん断応力がかかると dislocation は動き出し塑性変形が進行する。微視的に見ると、Frenkel-Kontorova モデルの谷を熱活性化過程でぴょんぴょん移っていくイメージであるが、この過程は次節で取り扱う。この節では粗視化した連続モデルで話を進める。

dislocation の速度とひずみ速度を関係づける。まず、ある時間内に dislocation が L 動いた (小体積内を端から端まで抜けた) とすると、結果として生じるひずみ ϵ は b/H となる。これを Λ を用いて表すと $\epsilon = \Lambda bL$ と書ける。両辺を時間について微分して、ひずみ速度 $\dot{\epsilon}$ の表式について

$$\dot{\epsilon} = \Lambda b \dot{L} \quad (3)$$

を得る (\dot{L} が dislocation の速度)。すなわちひずみ速度は dislocation 密度とバーガースベクトル長に比例する。

この式から、dislocation のだいたいの速度を見積ってみよう。引っ張り試験などの典型的な実験ではひずみ速度はだいたい $\dot{\epsilon} = 10^{-2}$ [1/sec] である。一方鉄や銅などの金属ではだいたい $b = 2.5 \times 10^{-10}$ [m] である。dislocation 密度は試料を作る条件によって様々であるが、だいたい 10^{10} から 10^{14} [1/m²] 程度であるので、dislocation 速度はオーダーとしてだいたい 10^{-2} から 10^{-6} [m/s] となることが分かる (すなわち秒速ミリメートルからマイクロメートル)。実験では透過型電顕 (TEM) 内引っ張り観察により dislocation の運動を直接見ることができる。そして観察される dislocation の速度はだいたいその程度である。もっともミリメートル毎秒くらいになると速すぎてすぐ視野から消えてしまうので見えないのだが。

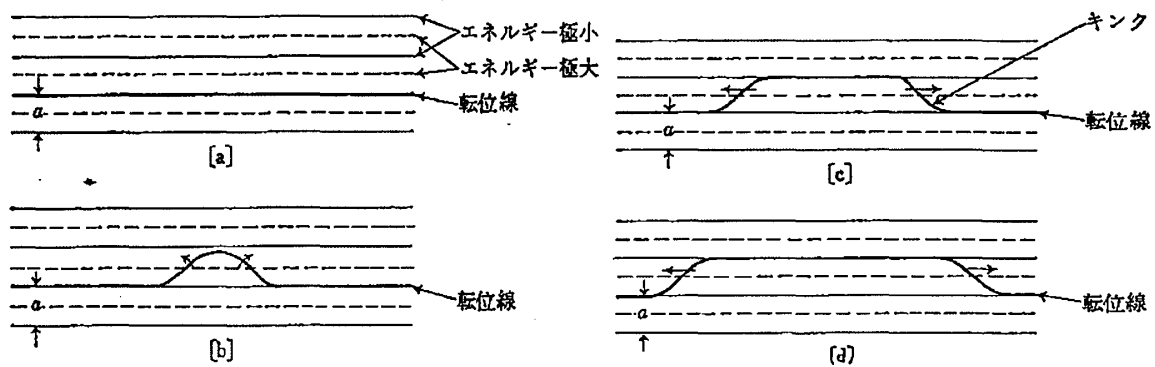


図 7: dislocation はパイエルスポテンシャルの山をキンクペアを作りながら越えていく。

3.1.2 パイエルスポテンシャルの考慮：キンクダイナミクス

ここから原子の離散性を考慮する。すべり面は原子の粒粒からなっているのだから、Frenkel-Kontorova モデルで見たように原子スケールの凸凹がある。先ほどは原子面どうしの接触ポテンシャルを考えたのだが、今度はもう少し粗視化して原子一つ一つではなく dislocation に注目する。すると dislocation の感じるポテンシャルは洗濯板状の一次元型周期凸凹ポテンシャルとなる¹³（ただし山の高さは先ほどよりずっと低くなる）。その凸凹をパイエルスポテンシャルと呼び、その山を越えるのに必要な応力をパイエルス応力と呼ぶ。降伏機構として dislocation 機構が支配的である場合はパイエルス応力は降伏応力と同義である。この山を越える際の活性化エネルギーがすべり摩擦の原因であり、余分なエネルギーは音波となって放出される。このモデルは以下のような Langevin 方程式で書くことができる。

$$A\ddot{h}(x,t) + B\dot{h}(x,t) - \gamma\partial_x^2 h(x,t) = \partial_x U(x) + b\sigma + \xi(x,t) \quad (4)$$

パイエルスポテンシャル $U(x,t)$ の存在を考慮すると、dislocation が直線を保ったまま一様に進んでいく解はエネルギー的に高コストであることが直観的に分かるだろう。つまり、山を越えるのに必要な正味の応力を加えなくてはならない。（谷の高さを ΔU と書くと、一原子あたりすべり方向に $\Delta U/b$ 程度の力が加わればよい。ここで b はバーガースベクトルの大きさと谷から谷への距離に等しい）。いま、それよりもちょっとだけ低い応力がかかっているときを考えよう。大部分の原子は谷の中を動いているが、結晶中の原子には熱揺らぎがあるから、一部大きな揺らぎを持って次の谷へ飛び移るものが出てくる。どこか一箇所熱揺らぎの助けで山を越えてしまえば、あとは線張力でまっすぐになるろうとする力によって全体が次の谷に移る（図 3.1.2）。このような dislocation の運動をキンクダイナミクスと呼び、一箇所だけ次の谷へ移った部分をキンクペアと呼ぶ。キンクペアの幅があまり小さいと、キンクペアは消滅する（元の谷へ戻る）。次の谷へ移る連鎖が進

¹³これは電荷密度波のスライディングの文脈における剛体モデルと同じである [5]。

むにはある程度のキンク幅が必要である。その臨界値を臨界キンク幅という。このように dislocation はキンクダイナミクスによる熱活性化過程の繰り返しで進行してゆくので、たとえ外部からかけている応力が同じでもその速度は当然ながら温度によって大きく変わる。マクロに見るとこれは降伏応力の温度依存性として現れる¹⁴。すなわち低温では降伏応力が高く(硬く)なり、高温では低く(軟らかく)なる¹⁵。

3.1.3 高応力変形の特徴

前節ではパイエルスポテンシャルの存在により dislocation の運動が熱活性化過程となること、それが降伏応力の温度依存性の原因であることを見た。これは微視的に見れば dislocation 速度が対応するので、同じ応力がかかっているならば低温ほどひずみ速度が小さいということになる。ところが瞬間的に強い応力がかかるような塑性変形では、ひずみ速度の温度依存性は反対になる。このメカニズムは直観的には以下のように説明される。外部応力が $\Delta U/b$ よりも大きい場合、dislocation 運動に対するポテンシャルバリアは無効になり、dislocation は熱活性化過程によらず外力に駆動されて動いていくようになる。このようにパイエルスポテンシャルよりも大きな応力がかかって連続的にポテンシャルの山を乗り越えていくような運動形態を飛行運動と呼ぶ。この場合、熱活性化過程によるジャンププロセスは無意味になるので、dislocation 速度を決めるのは式(4)に表れる摩擦係数 B である。そして摩擦係数 B は温度について増加関数であるので、高温の方が dislocation 速度は遅くなる。

これは衝撃圧縮などの瞬間的に強い応力がかかった状況での変形について面白い効果をもたらす。衝撃圧縮ではひずみ速度が 10^5 から 10^6 [1/sec] にもおよび、引っ張り試験など(だいたい 10^{-3} [1/sec] 程度)と比べるとはるかに大きな dislocation 速度が必要とされる¹⁶。このような場合の dislocation の運動形態は前述した飛行運動であり、パイエルスポテンシャルの山よりも大きな応力が降伏応力として観測される。そして飛行運動における dislocation 速度は高温のほうが小さいので、高温になると降伏応力が高くなるという逆転現象が起こるのである。この現象は実験でも観測されている。

¹⁴ このモデルにおいて、定常状態での dislocation 速度はアレニウス因子 $\exp(-\Delta U/kT)$ をもち、この因子が温度依存性について支配的となることが予想される。降伏応力はマクロな応力ひずみ曲線において傾きが変わるところの応力として定義されるが、検出可能な程度まで応力が下がるにはある程度の dislocation 速度が必要である。これがマクロ降伏応力に対応する臨界 dislocation 速度に対応する。

¹⁵ ただし f c c 金属での実験では、降伏応力は温度に対してほぼ線形に低下するので定量的にはそれほど単純な話でもない。一方 b c c 金属では非線形となり、とくに低温側での降伏応力上昇が著しい。

¹⁶ このことは dislocation 速度がそのまま 9 桁大きくなることを意味しない。式(3)より、ひずみ速度は dislocation の速度と密度の関数であり、衝撃圧縮のような超高速変形では転位密度の著しい上昇も伴うからである。

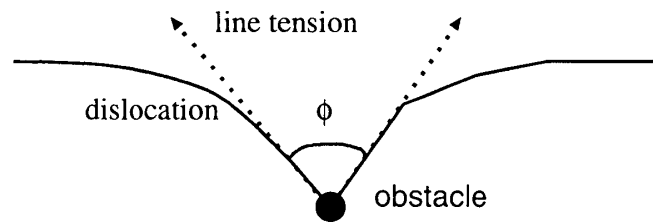


図 8: 障害物につかまっている dislocation の模式図。角度 ϕ が臨界値 ϕ_c より小さくなると dislocation はピン止めを振り切って進行する。

3.2 各種格子欠陥との相互作用：転位のピン止め

さて、前節までは dislocation 単体のダイナミクスについて簡単に説明してきた。以下では他の格子欠陥 (不純物など) との相互作用についてやや詳細に述べる。dislocation の進行経路に他の格子欠陥があると dislocation はその障害物に引っかかる。これを dislocation のピン止めと呼ぶ。障害物としては以下のようなものが考えられる。

1. 点欠陥 (格子間原子や空孔、溶質原子など)
2. 体積欠陥 (析出した不純物、点欠陥の集合体)
3. 他の dislocation

ここで 1 の点欠陥は dislocation の運動に際し微弱な効果しかもたらさない。強く効くのは 2, 3 である。この節ではまず 2. 体積欠陥による dislocation のピン止めについて論じる。3. 他の dislocation との相互作用については別セクションで簡単に紹介する。

さて、体積欠陥を考えた場合、dislocation との相互作用には斥力型と引力型二つのものがあり、ピン止め機構は全く異なる。どちらの相互作用になるかはバルクの剛性率と不純物の剛性率との大小関係で決まる。このことは dislocation のもつ弾性エネルギーが剛性率に比例することから来ている。すなわち析出物の剛性率がバルクより低ければ (軟らかければ)、dislocation 周囲のひずみ場のエネルギーが下がるので、引力型である (当然、逆の場合は斥力)。斥力型の場合は次のサブセクションで述べることにして、このサブセクションでは引力型のピン止めについて解説する。

この場合 dislocation は析出物に近づくと吸い込まれ、少しの応力をかけたくらいではそこから脱出できず、図 3.2 のように大きく張り出す。そしてある臨界応力を越えると一気に抜ける。このときの角度を臨界角と呼び ϕ_c で表す (臨界角 ϕ_c が小さいほど障害物の強度としては強い)。そこで障害物強度を表すパラメータとして、 $\alpha = \cos(\phi_c/2)$ を導入する (「ピン止め強さ」と呼ぶ)。ピン止め強さは 0 から 1 までの値を取り、障害物が強い極限で 1、弱い極限で 0 となる。

さて、このような障害物が点在している系を考えた場合、その降伏応力は障害物の影響でどのくらい上昇するのであろうか？ まずは大雑把に dislocation を線張力 γ を持つ弦と

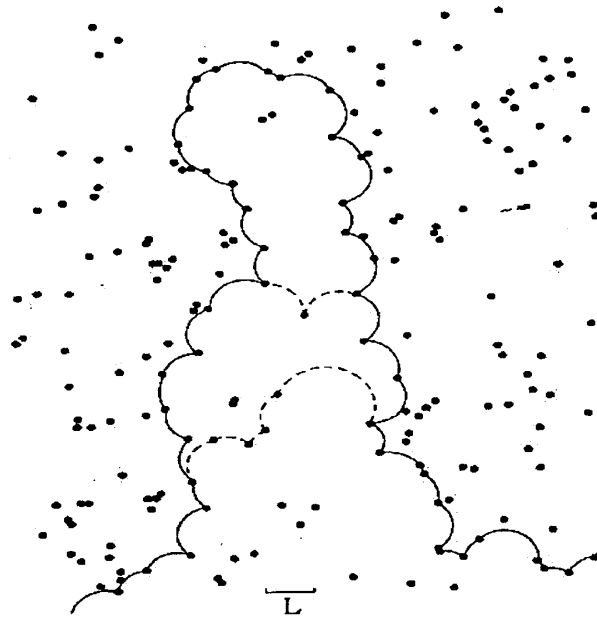


図 9: 障害物がランダムに配置したすべり面を dislocation が運動していく様子 [6]。ここでは自己相互作用は取り入れられていないので、このモデルは実は二次元での wetting モデルと等価である [7]。

して考え、障害物が間隔 L で周期的配列をなしているとして見積もってみよう。すべり面にかかる応力を σ で書き、dislocation を張り出させようと働く応力と、直線に戻ろうとする線張力とがつりあうという関係式より $\sigma b = 2\gamma \cos(\phi/2)/L$ が成り立つ。(この時点では ϕ は任意角)。そして徐々に dislocation が張り出して (ϕ が小さくなってゆき)、 $\phi = \phi_c$ になると抜けるのだから、そのときの応力は

$$\sigma = \alpha \frac{2\gamma}{Lb} \quad (5)$$

と書ける。dislocation の線張力 γ はおよそ $Gb^2/2$ と見積もられるので、降伏応力は

$$\sigma = \alpha \frac{Gb}{L} \quad (6)$$

とも書ける。これが間隔 L で周期的に並んだ障害物の間を dislocation が抜けるために必要な応力である。

さて、実際には障害物はランダムに配列しているのだから、その影響を考慮しなくてはならない。これについては計算機によるシミュレーションがあり (図 3.2)、ピン止め強さ強度 α と平均障害物間隔 \bar{L} との間にはおよそ

$$\sigma = \frac{Gb}{\bar{L}} \alpha^{1.5} \quad (7)$$

の関係があることが分かっている。これがマクロな降伏応力とミクロなピン止め強さ α を結びつける関係式である。よって、 α と平均間隔 \bar{L} が分かればおよそその降伏応力が見

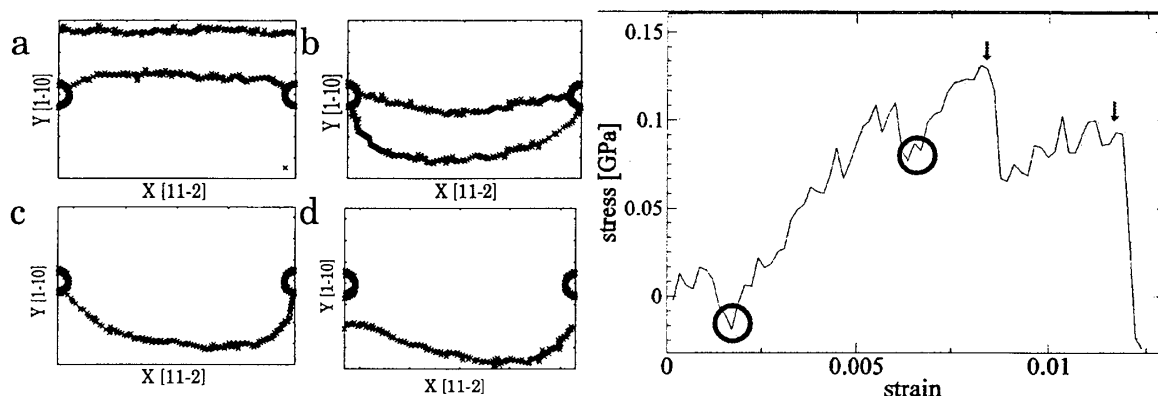


図 10: (左) ボイドによる dislocation ピン止めのスナップショット。各スナップショットの時間間隔は不均等で、ab 間が 43 ps, bc 間が 19 ps, cd 間が 113 ps となっている。(右)dislocation ピン止めの MD シミュレーションにおける応力ひずみ曲線。2箇所(丸で囲った部分)の低下は dislocation がボイドに吸い込まれたことによる。

積もれることになる。そこで問題は、 α をいかにして求めるかということであるが、これは dislocation と障害物の原子論の詳細に依存してしまい、dislocation を「線張力を持った弦」として見る連続体的取り扱いの範囲では答えが出ない問題である。これについては分子動力学 (MD) シミュレーションなど原子を明示的に取り扱う手法により、障害物の種類や大きさなどに応じた α を別途評価しなければならない。このような目的意識に基づく MD を以下で簡単に紹介する。

3.2.1 空孔集合体によるピン止め

まずは障害物としてもっとも単純な、空孔集合体による dislocation のピン止めについて述べる。これは非現実的な欠陥と思われるかもしれないが、たとえば高エネルギー中性子の照射を受け続けるような原子炉の構造材料では空孔が過剰に生成されるので、空孔集合体が多量に存在する。ここでは空孔集合体をボイドと呼ぶ。当然ながらボイドは dislocation の障害物となるので、材料の硬化をもたらす。以下では分子動力学シミュレーションによる dislocation ピン止めの様子を紹介する [8]。物質は Cu であり、dislocation は edge dislocation にとった。

図 3.2.1 にボイドにピン止めされる dislocation のスナップショットと応力-ひずみ曲線をそれぞれ示す。まず dislocation がボイドに近づくと、ずっと吸い込まれる。これは応力ひずみ曲線における応力の低下として現れる。(図において黒く丸で囲った部分)。応力をあげていくとそこからだんだん張り出していき、ついにはピンが外れて dislocation が飛んでいきひずみを一気に解放する (矢印で示した)、という様子が応力-ひずみ曲線から分かるであろう。

当然ながらピン止め応力はボイド半径とともに大きくなっていく。表にその数値を示

表 2: ピン止め強さ $\alpha = \cos(\phi_c/2)$ と降伏応力 (critical resolved shear stress; CRSS) のボイド半径依存性

ボイド半径 nm	α (dimensionless)	CRSS MPa
0.3	0.38	47
0.5	0.50	63
1.0	0.72	83
1.5	0.80	95
2.5	0.91	106

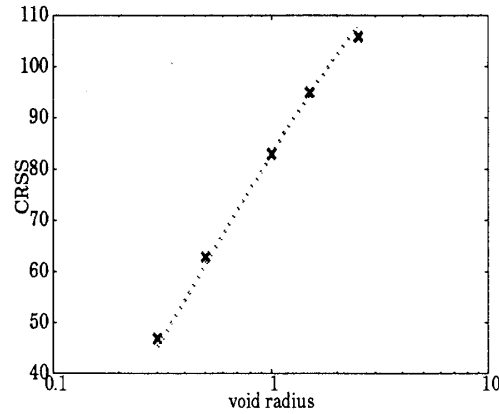


図 11: 降伏応力 (ピン止めが外れる応力) のボイド半径依存性。点線は $\log(r)$ に比例。

す。ここで α は前述したピン止め強さ $\cos(\phi_c/2)$ である。実は α と降伏応力はボイド半径に対して対数依存性を示すことが分かっている。(図 3.2.1) この対数依存性は dislocation のもつ弾性エネルギーに対応している。すなわちボイドで dislocation が消されてエネルギーが下がる (これが引力相互作用の源)。低下した分のエネルギーを外部応力によって供給すれば dislocation のピン止めが外れる、というピクチャーである。

ボイドによる dislocation ピン止めにおいて特筆すべきことは、降伏応力の温度依存性である。MD では、降伏応力とピン止め強さ α の値は温度にほとんど依存しないという結果が得られている。これはピン止めを外すための活性化エネルギーが非常に高いため、ピン止めが外れる過程が非熱的 (力学的) 過程となっていることを意味する。

3.2.2 軟らかい析出物によるピン止め

次に軟らかい析出物によるピン止めについて述べる。この場合も、dislocation の弾性エネルギーは析出物に近づくにつれて減少するので、相互作用は引力型であり、ピン止め

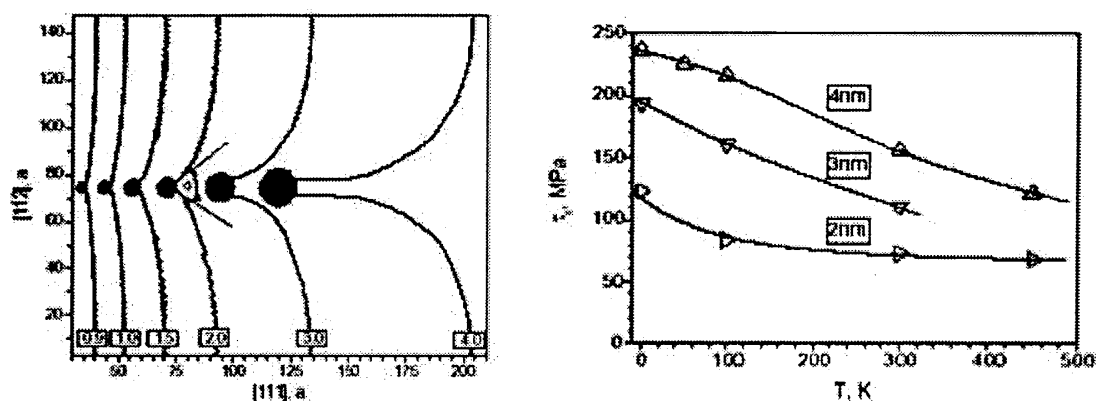


図 12: (左) 析出物による dislocation ピン止めの様子 (異なる大きさの析出物についての結果を重ね書きしている)。析出物が大きいほど dislocation の張り出しが大きくなり臨界角が小さくなっている傾向が分かる。(右) ピン止めが外れる応力 (降伏応力) の温度依存性 [9]

のダイナミクスとしては先ほどのボイドによるものと本質的に変わるところは無い。もっとも異なるところは、こちらの場合は温度依存性があるらしいということである。以下に Oak Ridge National Laboratory の Y. N. Osetsky らによる α -鉄中の銅析出物による dislocation ピン止めの MD の結果を紹介する [9]。図は降伏応力の温度依存性である。直径が大きいものほど温度依存性は顕著である。しかしどうも降伏応力には最小値があるようで、その応力に達するとあとは温度を上昇させても降伏応力は変わらない。この傾向は直径が小さい析出物に顕著に現れる (たとえば直径 2nm のもの)。

銅析出物のほうがボイドよりピン止め力が弱く (活性化エネルギーが小さく)、しかも析出物原子の熱揺らぎが効くので温度依存性が (ボイドよりは) 出やすいということは直観的に分かる (ボイド内部は真空なので熱揺らぎは無い)。しかしある応力値でプラトーを示すのはよく分からないところがある。更なる定量的な解析が必要である。

3.3 硬い不純物との相互作用

さて、前セクションで述べたように析出物がバルクより硬い場合は斥力相互作用が働くので、dislocation は析出物になかなか近寄れない。そうこうしている間に dislocation の張り出しは大きくなり、張り出し角はついには完全にゼロになる。すると、隣り合わせた dislocation が引き合って合体し、そのまま通過していく dislocation と、析出物の周りにループ状に残る dislocation とに分裂する (図 3.3 参照)。このような機構をオロワン機構といい、析出物の周りに残されたループをオロワンループと呼ぶ。実は、だいたい dislocation の教科書では、硬い析出物との相互作用については通常ここまでしか書いていない。しかしこの機構を原子的に見ると、ループ内部 (析出物の周り) の原子は結局

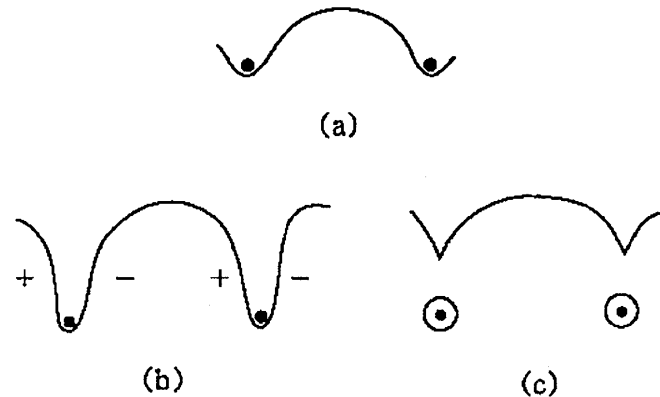


図 13: オロワン機構の模式図。dislocation が硬い析出物を抜けていくさま。析出物の周りには dislocation ループ (オロワンループ) が残る。

dislocation が通過していないので全くすべっておらず、ループの外側の原子だけがすべって新たな界面を生んだということになる。よってループの周りにはエネルギーの高いひずみ場が存在しており、エネルギー的にかなりコストの高い構造である。

マクロな塑性変形の間には、dislocation は一つの析出物を何十本と通るので、このオロワンループは次々と積み重なっていくはずである。そうするとますますひずみがたまり、エネルギーはどんどん高くなっていく。また、このひずみ場は次にくる dislocation と斥力相互作用をさらに強めるので、降伏応力は塑性変形の間中どんどんあがっていく。このような現象を加工硬化と呼ぶ。

さて、オロワン機構について加工硬化の影響を計算すると、実は実験と定性的に合わないことが古くから知られている。実際に透過型電子顕微鏡で観察すると析出物の周りにオロワンループが観察できることは稀である (らしい)。そしてオロワンループとは違うタイプの dislocation ループが数多く発見されることがある。これは析出物を囲むような形ではなく、析出物の近くにあるだけのループである。よってこの dislocation ループによる硬化はオロワンループによるものほど強くは無く、マクロな硬化を計算すると実験とは整合性があることが分かる。つまり、実はオロワンループは実際にはほとんど発生しておらず、違う機構が支配的なのではないかということである。

そのようなわけでオロワン機構に代わる別のいろいろな機構が提唱されたが、最終状態として別の dislocation ループを生む過程自体は可能な形が複数あるので、その中間状態がどのようなものであるか、それぞれの過程について精確なエネルギーランドスケープを計算しない限り一意にどうこうは言えない。(すなわち実験と整合性のある微視的過程は一意的には定まらない)。結局この問題は理論的にはうやむやになっていたのだが、実際にどのような過程が起こっているかは前節で見たように MD によって直接確かめられる。以下

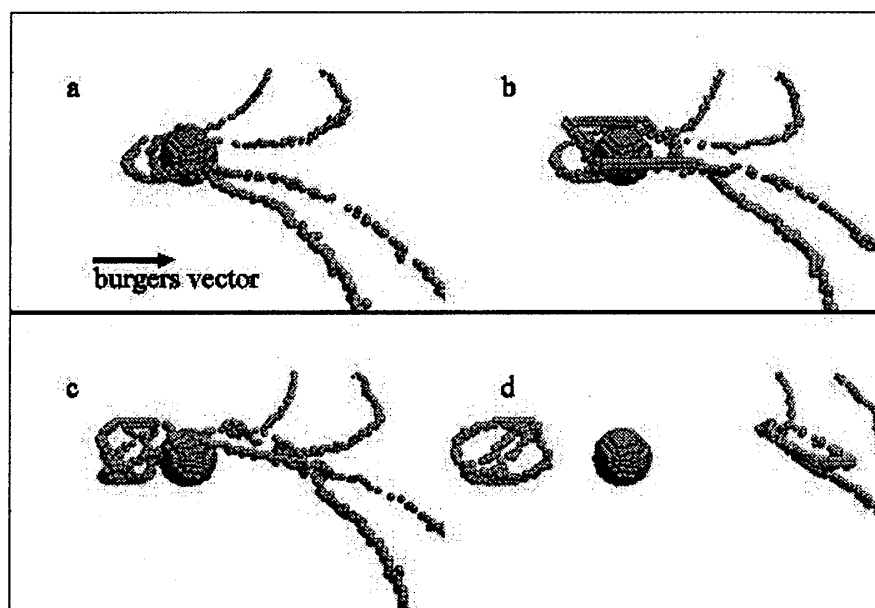


図 14: 硬い析出物についての MD シミュレーションの結果。

でそのシミュレーションについて簡単に紹介する。

まずは図に dislocation と析出物との配置の連続スナップショットを示す。ここで析出物は全く動かない原子としてモデル化している。その他のパラメータは空孔集合体の場合と同様である。edge dislocation から出発して析出物の周りで止まり、徐々に張り出す (a)。完全に張り出した部分は screw dislocation になるので、交差すべりが可能になり、別のすべり面へ動く (b)。その後、析出物の上のすべり面へ再び交差すべりを起こし、そこで合体して消滅する (c)。残された構造は dislocation ループ (上流) とジョグをもった dislocation (下流) である (d)。このジョグはしばらく dislocation にひきずられていくが、結局しばらく行った所で張り出した dislocation が合体を起こしてループがもう一つ取り残される。こうして析出物の周りに二つ dislocation ループが出来る。オロワンループはどこにも現れない。これら二つのループはプリズマティックループと呼ばれるもので、析出物の上流に残されたものは格子間原子が円盤状に集まったものであり、下流のものは空孔が同様に集まったものである。

この機構は実は 1970 年に Hirsch と Humphreys によって提唱されたものであり [10]、今更ながらその妥当性が直接確認されたことになる。これには Hirsch 機構と名前がついている¹⁷。ただし実験では同一試料内にオロワン機構と Hirsch 機構が共存する様子も見られており、硬い析出物についてこれら二つの機構の発生論理についてはまだ完全には分かっていない。いずれにせよ加工硬化との整合性と今回の MD の結果から言えば、たいてい

¹⁷本来なら Hirsch-Humphreys 機構と呼ぶべきだと思うが、1970 年以前に Hirsch 単独で (不完全な形ではあるが) 似たような内容の論文を発表していたので Hirsch 単独の名前がついたのかもしれない。また Hirsch は dislocation 理論業界では大御所だから、という理由もあるかもしれない。Humphreys の方はこれ以外であまり名前を聞いたことがない (筆者の不勉強のせいかもしれない)。

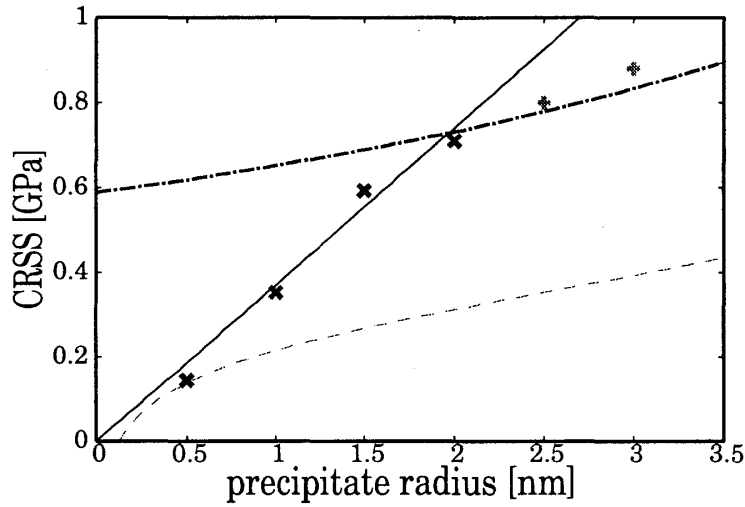


図 15: 硬い析出物を抜ける際の応力の半径依存性。

の場合において Hirsch 機構が支配的であることだけは確かである。

さて、この機構について降伏応力はどうなっているだろうか。これは硬い析出物だから前セクションにおける降伏応力の式においては $\alpha = 1$ とおいた式が対応する。すなわち

$$\tau = \frac{G}{b} L \quad (8)$$

がこの系での降伏応力となっていることを予言する。もちろんこれには線張力が一定値 $Gb^2/2$ であるというやや乱暴な計算に基づく値が入っているし、そもそも析出物の半径自体を無視しているのできちんと合うわけが無いのだが、どの程度良い近似になっているのかを確認する意味がある。図 3.3 に式 (8) による応力 (dot-dashed line) と、実際に MD で得られた応力 (シンボル X) とを示す。MD で得られた値は半径依存性が強く出ており、析出物半径についてほぼ線形に上昇している。これは析出物が大きければ大きいほど dislocation の合体消滅が起こりにくいことに対応している。およそ 2nm でオロワン応力 (8) と MD の値は一致する。これは連続体近似において無視した長さスケール (紫外カットオフ) がおおよそ 2nm 程度であるということを意味する。

また、連続体計算によって提唱された降伏応力の表式がもう一つある。こちらは析出物の大きさが考慮に入っており、

$$\tau_{\text{BKS}} = \frac{Gb}{2\pi L} \log \frac{1}{(0.5r^{-1} + L^{-1})b} \quad (9)$$

というような形をしている。これは Bacon らによって数値計算の結果に対するフィッティング式として見出された [11]。これは dislocation の自己相互作用の効果も含めた式であり、図 8 において点線で示されている。見ての通り、MD の結果とは合っていない。これは材料分野では割と信用されて用いられている式なのだが、実際にはかなりの過小評価

であることが分かる。実際むしろ空孔集合体によるピン止め応力に近いようである。(もちろん本来は硬くて通り抜けられない障害物についての計算だったのだが)。そのようなわけでこの式にはこれ以上関わらない。いずれにせよ、硬い析出物について定性的機構は分かってきたものの、降伏応力に関する定量的議論はまだまだこれからというところである。

4 dislocationの生成ダイナミクス

さて、「高応力による変形」のところで少し触れたように、塑性変形のひずみ速度はdislocationの速度と密度に比例する。応力がある程度高い場合、dislocationは結晶内部で新たに生成し、それが動くことによって更なる変形を促進する。dislocation生成機構は主に以下の2種類が知られている。

1. 既存のdislocationのセグメントからFrank-Reed機構によって生成 (図参照)
2. 粒界や表面などから生成
3. 完全結晶から生成

一般にバルク中の塑性変形においては1のFrank-Reed機構が支配的(もっとも低い応力で起こる)と思われる。一方、2, 3は比較的高い応力のもとで起こる現象なのでバルク中ではあまり問題にならない。しかし亀裂先端や介在物の周囲など応力集中の起こる部位で支配的となる。そして実際に金属を材料として用いるときには応力集中が起こる部位での塑性変形の挙動が本質的に重要である(要は建造物などの亀裂が進行するかしないかという問題!)。すなわち、高応力状態でのdislocation生成の性質を知ることが結局一番重要となるのである。以下では上記した3つの要素について説明するが、そのような理由から1についてはごく簡単にとどめ、2および3の性質についてやや詳しく解説することにした。

4.1 dislocationセグメントからの増殖

1で述べたFrank-Reed機構とは、図のように2重交差すべりなどによって両端が固定されたdislocationのセグメントから新たなdislocationが生成する機構であり、オロワン機構のような張り出し+消滅によってループ型のdislocationが次々と発生していく(図4.1)。よってこの機構の発現する応力はオロワン応力と同じく Gb/L になるはずである(L は両端が固定されたdislocationセグメントの長さ)。また、このようなdislocationセグメントをFrank-Reed源と呼ぶ。長い(L が大きい)セグメントほど低い応力でdislocationを生成できるが、そのためには増殖過程でdislocationの走破する領域内に新たにdislocation

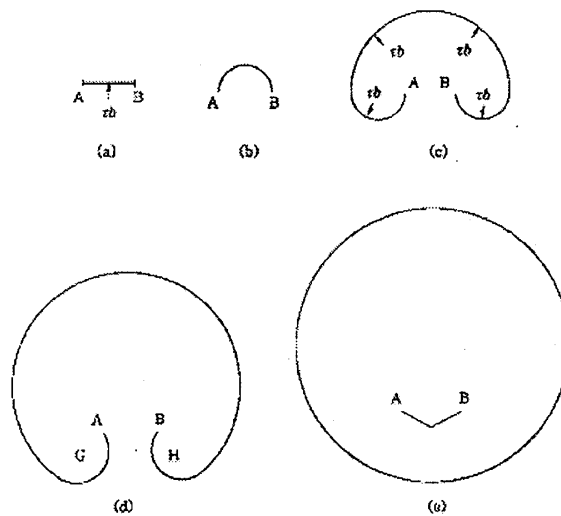


図 16: フランク・リード機構により dislocation セグメントから新たな dislocation が生まれる模式図。

をピン止めする障害物 (不純物や他の dislocation) があってはならない。そしてそのような可能性は L が大きいほど低くなるので、あまり大きな L をもつ Frank-Reed 源も有効には機能し得ない。dislocation が走破する領域を大まかに πL^2 と見積もると、障害物面密度 A がこの逆数より大きければ Frank-Reed 源はうまく機能しないことになる。もっとも L の値としては同一試料内に任意のものがあろうるので、「 $L < \sqrt{A/\pi}$ のセグメントならば Frank-Reed 源として作用する」ということになる。これはもちろん不純物密度や dislocation 密度によって変わってくるので、実は上述した dislocation 生成機構のうちどれが支配的とは一概には言えない。しかしここでは Frank-Reed 機構による dislocation の生成についてはこれ以上深入りせず、2 と 3 の過程について少し詳しく述べていく。

4.2 完全結晶からの dislocation 生成

完全結晶部分からの dislocation 生成は、最初のセクションで述べたような完全結晶のすべり面を一部分だけずらすことによる dislocation 発生である。初期状態としては全くすべっていないのだから、まずどこか有限の面積内ですべりが始まらないといけない。つまりすべった領域は孤立しており、dislocation はすべりの始まった面積を囲むループとして出現する。(一方で次のサブセクションで扱う表面からの dislocation 生成はすべりが表面から始まるので、dislocation はその両端が表面へ抜けた線分となる)。

実は完全結晶中に発生した dislocation ループは安定ではない。もともと完全に組み合わさっていたものを一部だけずらすのだから結晶中の弾性エネルギー上昇は著しい。せん断応力がなくなればまた元に戻ろうとするし、応力がかかっていればその応力を解放しよ

うとしてどんどん伝播していく(すべった面積が増えていく)。結局 dislocation ループは表面まで突き抜けて消滅する。そして表面にステップを残す。

このあたりの事情をもう少し定量的に見てみよう。まず完全結晶にせん断応力 σ がかかって、半径 R の dislocation ループが発生した状況を考える。この dislocation ループの弾性エネルギーは連続体的な計算では

$$U(R) \simeq \frac{Gb^2R}{4} \frac{2-\nu}{1-\nu} \log \frac{R}{r_0} \quad (10)$$

と評価される。(ただし ν はポアソン比で r_0 は紫外カットオフ。たいてい $r_0 \simeq 5b$ 程度に取る)。この表式から分かるように、dislocation ループのエネルギーはおおよそ $R \log(R)$ に比例して大きくなる。よって完全結晶中の dislocation ループは放っておけばどんどん小さくなろうとする。しかし今は応力がかかっており、dislocation が広がれば蓄積された弾性エネルギーが解放される。これが dislocation ループを広げようとする駆動力となる。dislocation による弾性エネルギー解放とは原子面のすべりに要した仕事であり、力 \times 変位で求まる。力は $\sigma\pi R^2$ で(応力 \times 面積)、個々の原子の変位はバーガースベクトル長 b であるから、外力のした仕事は $\sigma b\pi R^2$ となる。よって結局外部応力 σ のもとで生成しつつある半径 R の dislocation は以下のエネルギー関数に支配される。

$$U(R) \simeq \frac{Gb^2R}{4} \frac{2-\nu}{1-\nu} \log \frac{R}{r_0} - \sigma b\pi R^2 \quad (11)$$

この関数は $R = R_c$ を境に増加から減少に転じる。すなわち、dislocation ループには臨界半径 R_c が存在し、 $R < R_c$ では不安定だが $R > R_c$ になると安定に伝播するようになる。これは相分離における第二相の nucleation dynamics と非常によく似ている¹⁸。そして $U(R_c)$ が活性化エネルギーに対応し、これは外部応力 σ の関数と見ることができる(σ についての減少関数)。活性化エネルギーが熱エネルギーで越えられる程度まで下がれば dislocation は完全結晶中から生成するから、そのような σ を実際の物質についての数値を代入して実際に見積もってみると、剛性率 G の数分の一程度となることが分かる。これはセクション 2 において説明した Frenkel-Kontorova モデルを一様に動かすのに必要な応力と結局同程度である。すなわち完全結晶の降伏応力は dislocation を生成する応力と同じである。

このような強い応力がかかる状況は亀裂先端である。亀裂先端部位で dislocation ループが発生し塑性変形が進行すれば応力が緩和され、さらに亀裂形状が鈍化して (crack-blunting)、それに伴い応力集中も起こらなくなる。すなわち亀裂は塑性変形によって「癒される」。亀裂の癒され具合は、上述した論理から温度依存性をもつことが分かるだろう。高温ほど dislocation ループが発生しやすくなるので材料は破壊されにくく、低温においては逆にもろくなる¹⁹。

¹⁸ただし第一項の界面エネルギーは R^2 に比例し、第二項はバルクのエネルギーで R^3 に比例。

¹⁹この傾向は降伏応力の温度依存性が顕著な b c c 金属ほど著しい。

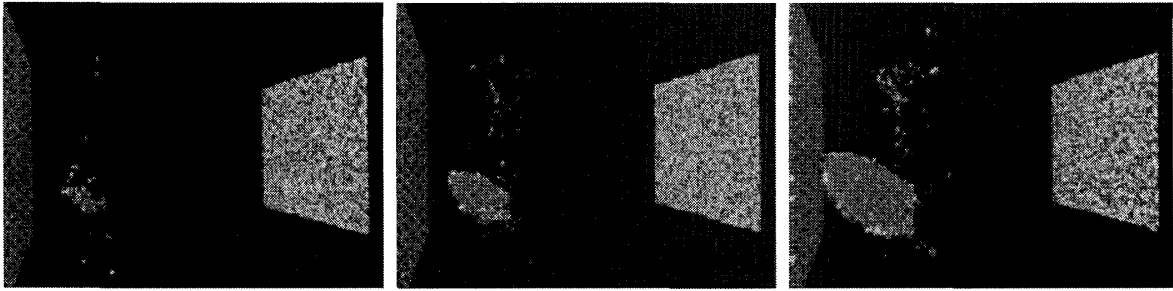


図 17: 完全結晶における dislocation ループ生成の様子。すべった原子（と自由表面原子）だけを表示している。

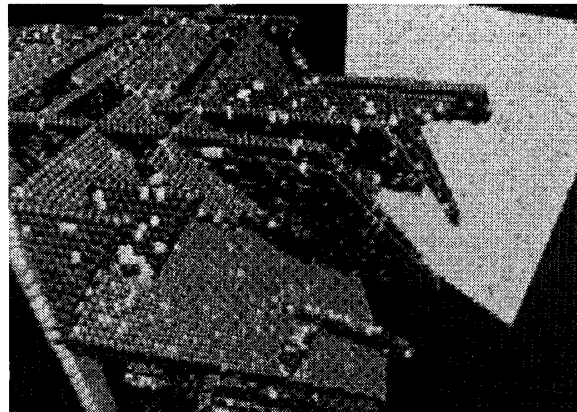


図 18: 異なるすべり面に多数発生した dislocation ループどうしが交差する様子。

さて、以上述べてきたことを実際の現象で見よう。ここでは現象を見やすくするために、亀裂先端ではなくバルクの衝撃圧縮に際しての dislocation ループ生成を見ることにする。衝撃圧縮のひずみ速度は最大で 10^6 [1/sec] 程度までいくため、既存 dislocation の高速運動だけでは追いつかない。バルク中においても新たな dislocation が次々と生成されるのである。以下では衝撃圧縮についての MD シミュレーションを紹介する [12]。ポテンシャルは Lennard-Jones であり、f c c の完全結晶中を $\langle 100 \rangle$ で進行する衝撃波を加える。この方向は f c c の 4 つのすべり面に対して全て均等に応力を及ぼす特別な方向である。

衝撃波の入射後すぐにすべりが開始し dislocation が発生している様子を図 4.2 に示す。（図では滑った原子面だけを表示させているので、円板の端が dislocation となっている）。図 4.2 は一つのループしか表示していない初期段階であるが、もう少し時間発展すると多数のループが同様に発生し、結晶中を埋め尽くす。いまの衝撃波方向では dislocation は 4 つのすべり面上にそれぞれ発生するので、それらが広がっていくとお互いに交差しな

表 3: アルゴン完全結晶に対する、衝撃圧縮による dislocation 生成応力とひずみ

初期温度	粒子速度	降伏応力	ひずみ
K	m/sec	GPa	%
6	291	1.08	13.8
18	275	0.957	13.7
24	261	0.886	13.1
37	243	0.765	13.0
49	216	0.623	12.3
64	202	0.535	12.2
77	186	0.443	11.8

がら結晶中を伝播する²⁰。その様子を図 4.2 に示す。

また、完全結晶中に dislocation ループが生成する臨界応力とそれに対応するひずみを表に示す。単位はアルゴンに合わせてある。固体アルゴンの剛性率はだいたい 1.5GPa 程度であり、降伏応力は剛性率の約半分ほどの値であることが分かる。これはセクション 2 で完全結晶についての Frenkel-Kontorova モデルを用いた議論と整合する。また、降伏応力は温度に対してほぼ線形に低下する。これは熱揺らぎを「種」にして dislocation ループが生成することを意味している。実際、絶対零度ではバルク中に dislocation は生成しないことが知られている。

4.3 表面からの dislocation 生成

ここでは表面からの dislocation 生成を調べるが、表面と言ってもいろいろなケースがある。通常の意味で外気に接している表面もあるし、粒界も広義には表面と言える。また空孔集合体(ボイド)も内部における表面と言うことが出来る。ここではとくに空孔集合体の表面からの発生過程に焦点を絞る。

実際に調べた状況は前サブセクションと同様に衝撃圧縮である。ただしここでは完全結晶ではなく、ボイドをあらかじめ含んだ結晶を初期状態として用意する。ポテンシャルは Lennard-Jones であり、衝撃波の方向は前と同様に $\langle 100 \rangle$ である。衝撃波がボイドを通過すると、ボイド表面からすべりが始まる。図 4.3 参照。ふたたび 4 つのすべり面が同時にすべり始めているのが分かる。ただし降伏応力は完全結晶の場合よりもだいぶ小さくなり、半径が数ナノメートルのボイドでも完全結晶の場合の 10% 程度まで下がる。この

²⁰dislocation どうしがお互いを飛び越えられるのは非常に高い応力がかかっているためであり、通常の(既存の dislocation が動く程度の)低い応力では交差した dislocation はお互いを乗り越えられず止まってしまう。これは dislocation が動かなくなるということであり、塑性変形が停止するので、ひずみがたまっていく。これが加工硬化の原因である。この現象は次のセクションで紹介する。

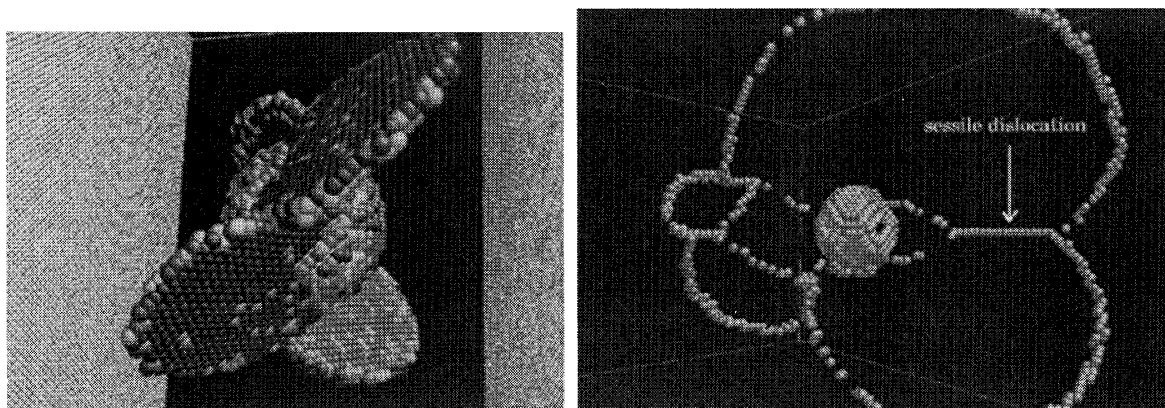


図 19: (左) ボイド表面からの dislocation 生成の様子。(右) 広がった dislocation の様子 (dislocation が発生してから 13 ピコ秒後のスナップショット)。異なるすべり面を動いてきた dislocation が接触し、動けなくなっている。

場合 dislocation 同士の接触相互作用により、四つのすべり面のうち二つは途中ですべりが止まってしまう (図 4.3 の右)。(完全結晶のときはそもそも降伏応力自体が高かったのが異なるすべり面の dislocation どうしが接触しても無理やり突き抜けた)。このような dislocation 同士の接触相互作用によりすべりが止まってしまう現象は次セクションにてもう少し説明する。

ボイドからの dislocation 生成についても降伏応力は温度上昇とともに単調に減少していく。ただ、融点の半分程度以上になると、ボイド表面ですべりを起こす前に、ボイドが崩壊してしまうと言う現象が起こる。もともとボイド自体熱力学的には不安定なのだが (長時間振舞では空孔拡散により消失)、融点の半分以上を境にしてその傾向は顕著となる。中性子照射を受けている材料でも、照射時の温度が融点の半分以上を越えるとボイドは生成されなくなるのである。実はボイド生成機構での温度効果は原子力材料工学における一つの根本問題なので、ここでこれ以上この問題を論じることは出来ないが、おそらくは表面原子の熱振動が強くなるのでボイド形状を保てなくなるのだろうと筆者は考えている。関連してたとえばナノ粒子²¹の融解 MD でも、融点の約 50% を越えると表面部分が融けたように見える (結晶を保てなくなる) ことが観察されている。

他方、ボイドの大きさに対する降伏応力の変化を見てみると、直観的に分かるように、ボイドが大きくなれば降伏応力は低下する。(図 4.3) 直観的には分からないのは、その依存性である。ボイドが小さいときは、降伏応力は半径にほぼ反比例して ($1/r$ で) 低下していく。しかし $r = 1\text{nm}$ から 1.5nm 程度のところから半径依存性は $1/\sqrt{r}$ に変化する。この現象についても解析はまだ進んでいない。モデル化による定量的研究が必要である。

²¹ 固体中ボイドに対して図と地の関係にある。

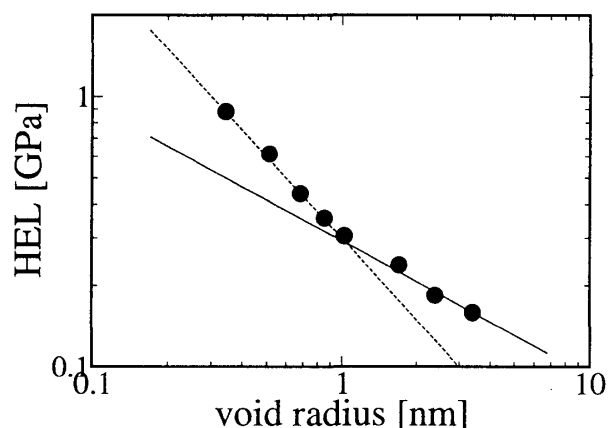


図 20: dislocation 生成応力のボイド半径依存性。

5 dislocation 多体系：加工硬化

金属を何度も曲げたり伸ばしたりということを繰り返していくとぽっきりと折れてしまうことは日常生活でも経験することかもしれない。塑性変形を繰り返すと金属は硬化してもろくなる。これを加工硬化と呼ぶ。日航機の事故でよく聞かれた「金属疲労」という言葉もほぼ同義語である²²。「硬化する＝dislocationが動けなくなる」ということだったが、この場合dislocationが動けなくなる要因は何なのであろうか。塑性変形を繰り返すとdislocationがいろいろ動き回るわけだが、その際dislocationどうしの相互作用—弾性相互作用と接触相互作用—によってdislocation同士は絡まりあう、ということが加工硬化の本質である。すなわち加工硬化の微視的メカニズムは、dislocationが絡まりあって動けなくなることに起因している。このようなdislocationの組織構造の形成機構こそが加工硬化の解明に不可欠であり、この現象の解析においては（これまで避けてきた）dislocation多体系の取り扱いが避けられなくなる。加工硬化をdislocation多体系のダイナミクスから解明することは材料科学における一つの中心的な課題であり、膨大な研究の蓄積がある。また最近では計算機シミュレーションによるアプローチも盛んである。しかし残念ながら、ここでは既存の理論や計算の試みを紹介することは出来ず、ごくごく簡単に現象を解説するだけにとどまる。

5.1 加工硬化の現象論：三つのステージ

さて、加工硬化は伸ばしたり引っ張ったりを繰り返さなくても、ただ一度の引っ張り過程でも見られる。それを示すのが図5.1である。これは引っ張り変形におけるひずみ応力曲線だが、ひずみが進むにつれて応力が非線形に上昇していくことが分かる。これはかなり一般的に見られる現象であり、大まかに言って傾きの異なる3段階の線形領域に分け

²² こちらの用語には経年に伴う劣化全てが含まれているが。

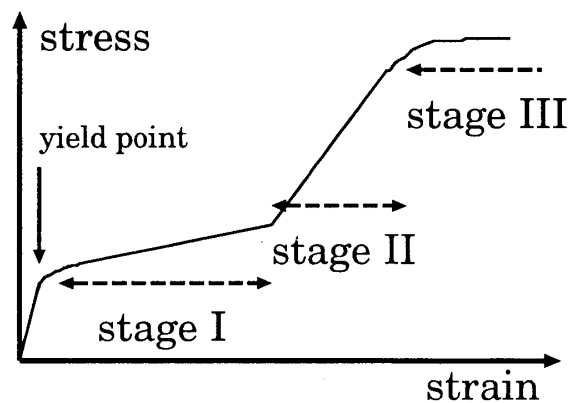


図 21: 大変形領域まで含めた応力ひずみ曲線。

られるため、それぞれをステージ I, II, III と呼んでいる。図では弾性変形の起こる領域は表示していないことに注意されたい。ここではステージ I とともに塑性変形が開始しており、弾性変形はステージ I 以前である。つまり全部言うと、弾性領域→ステージ I→ステージ II→ステージ III となる。さて、それぞれのステージでは微視的に何が起きているのであろうか？

5.1.1 ステージ I

塑性変形が始まったばかりのステージ I においては、図 2.1 で見たようなトランプ束の変形のように、単一すべり面だけがアクティブになっている状態である。つまり、外部応力がパイエルス応力を越えて dislocation が動き始めたくらいの段階である。塑性変形はこの様式でしばらく進行する。これはここまで MD などで見えてきたような、dislocation が同一平面上を一様に動いていくというピクチャーであり、dislocation 同士の相互作用はあまり効かないような領域である。だが、もちろん実際に結晶を引っ張って最後までトランプのようにバラバラに分解するわけがない。ある程度まで塑性変形が進行すると別のすべり面も活動し始める。それがステージ II である。

5.1.2 ステージ II

最初にアクティブになるすべり面での塑性変形がある程度進行すると、もはやその面だけでは応力を解放しきれなくなる。また塑性変形による粒 (grain) の相対位置の変化・回転によって各すべり面への応力が変化することによって、別のすべり面上の dislocation がアクティブになり始める。ただし、ここで初めてアクティブになったすべり面上の dislocation は、最初のすべり面上を動いている dislocation との接触相互作用が避けられない。すなわちステージ II においてはじめて dislocation 同士の接触相互作用が重要となってくるのである。これら接触相互作用は、線どうしの絡み合いのようなものであるが、dislocation

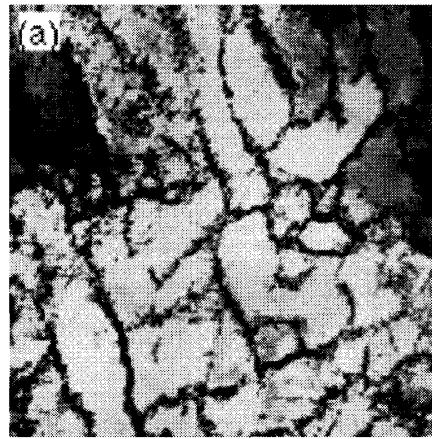


図 22: 加工硬化した金属における dislocation のセル構造 [13]。

同士はまた同時に弾性場を介した長距離相互作用もしているので、そのダイナミクスはセクション 1 でも述べたように非常に複雑なものになる。

基本的な接触相互作用は、セクション 4. 3 の衝撃圧縮による塑性変形でも観察された不動 dislocation である。異なるすべり面上を動いてきた dislocation 同士がぶつかると、接触部は合成された dislocation となり、すべり方向（バーガースベクトル）も二つの dislocation のすべりを合成したものになる。この合成されたバーガースベクトルが dislocation のすべり面に乗っていなければ、この dislocation は動けなくなる。このようにして、接触相互作用によって不動 dislocation が形成されるのである。その間も dislocation は次から次へとやってくるから、不動 dislocation のところで dislocation の渋滞が起こる。不動 dislocation によらずとも、異なるすべり面にある dislocation が切り合うことにより、dislocation どうしは絡まり合う。この絡まり合いも動けない dislocation が発生する原因のひとつである。

このような dislocation の渋滞や絡まり合いなどにより、ステージ II では dislocation の空間構造が発生する。図に電顕観察による写真を示す。これは dislocation の「セル構造」と呼ばれている。これは要するに dislocation 密度分布の空間構造であり、密な部分は絡まりあった dislocation が帯状に密集している。図で黒く見えているのが dislocation の密集している地帯であり、これをセル壁と呼ぶ。また、セル内部にも dislocation は存在しており、それらがまた小さいセル壁を作っていることがある（セルの階層構造）。

このようなセル構造は結晶構造を問わず（fcc、bcc、イオン結晶問わない）、加工硬化を示す結晶性物質に普遍的なものである。一般に応力ひずみ曲線の傾きは物質により千差万別であるが、驚くことにステージ II におけるその傾きは物質の詳細に鈍感であり、剛性率のおおよそ $1/300$ から $1/600$ であることが膨大な実験から知られている。これは背後に普遍的なダイナミクスが存在することを期待させ、dislocation のセル構造形成が加工硬化において本質的であることを示唆するものである。異なるすべり面における dislocation どうしの相互作用からこれらのセル構造のパターンを導出すること、そして硬

化の定量的理論を作ることは材料科学における基本問題であるが、この問題には決定的なアプローチはまだ存在していない。成功していない理論を紹介することにさほど意味があるとも思えないので、ここでは実験により見出されている現象論だけ簡単に紹介する。

1. 変形が進んでいくとセルの平均サイズ L は小さくなっていく。
2. セルの平均大きさ L とセル壁における dislocation 平均間隔は比例関係にある。(比例定数は 40 から 200 程度)。
3. ステージ II でのせん断応力 σ とセル壁での転位密度 Λ_w の間に $\tau = \alpha Gb\Lambda_w^{0.5}$ なる関係が成り立つ。(α は 0.1 から 1 の定数)。

ここではセル壁内部の dislocation 構造を考えていることに注意されたい。(境界としての薄い壁を考えているのではなく、dislocation の密集地帯として考えている)。

1. と 2. は、dislocation のセル状疎密構造は変形が進んでも全体として相似形を保ったまま小さくなるということを意味しており、要はスケール変換に対して形を変えないということである。よってバルク全体で平均した転位密度も、セル壁での転位密度も、セルの大きさの 2 乗に反比例する。

また、3. を式 (6) と比較してみれば分かるように、この応力上昇はセル壁に分布した dislocation によるピン止め効果であることが示唆される。なぜなら、セクション 3. 2 ではボイドや析出物による dislocation ピン止め効果が式 (6) で表されたのであるが、ここでは障害物がセル壁の dislocation に変わっただけと考えればよい。すなわちステージ II の硬化は、ピン止め強さ α を持った障害物 (他の dislocation) が平均間隔 $\Lambda_w^{-0.5}$ で分散しているセル壁を dislocation が抜けるのに必要な応力で与えられる。

であるから、ステージ II の硬化を定量的に予言するためには、セル組織形成についての理論が必要である。(とくにセル壁での平均 dislocation 密度を計算する処方)。また、上ではセル構造形成の原因として、dislocation の絡まり合いや不動 dislocation 形成による dislocation の渋滞などがあることを書いたが、実はこの要因についてもまだ確定した説は無く百家争鳴といった状態である (らしい)。現在では「絡み合い起因説」が有力だが、実は絡み合いを考慮しない簡単な反応拡散系的モデルでセル構造を再現したシミュレーションなどもあり [14]、長距離相互作用だけでもセル構造は出来るようだ。直観的には、絡み合いだけ考えていたのではセル組織が発達するにつれセル壁に寄与する dislocation の割合は増えていきそうなものである。(が、ステージ II を通してその割合は一定である)。よって絡み合いだけを考慮したモデルでは説明はできず、弾性相互作用もセル構造形成に本質的な役割を果たすことが予想される。しかし、ステージ II についてはそのようなわけでもそもそもセル構造の発生ダイナミクスからしてまだ全然分かっていないという段階である。

5.1.3 ステージ III

ステージ II の直線的硬化が終わると再び硬化の度合いは緩くなる。これがステージ III であり、ここでの応力緩和は「動的回復」と呼ばれている。ただしステージ III の機構について分かっていることは非常に少ない。とりあえず現段階で組織観察によって知られている dislocation 構造の特徴について二点述べる。

1. ステージ II で形成されたセル構造はそのまま残っているが、ステージ III ではセルサイズの減少は止まる。
2. screw dislocation の交差すべりが活発に引き始めていることが観察される。

そもそもセル構造の発生機構が分かっていないのだから、「セル構造の縮小が止まる」と「交差すべりの発生」とがどのように連関するかは全く分からない。しかし一般的に言って、交差すべりが起こるようになると dislocation の移動の選択肢が広がると言うことであり、まずそれだけでも硬化を減らす役割があるだろう。また、他すべり面に移ることによって dislocation 同士の接触相互作用が促進されるということがある。とくに、これまですべり面が異なっていたせいで出会うことの無かった dislocation 同士が出会うようになるので、それにより dislocation の合体・消滅が促進される。よって dislocation 密度の増加が抑制され、セル構造の発達が停止する … というのが考えうる一つのシナリオである。が、もちろんこれは全く憶測の域を出ない。

ここまでみてきたように、加工硬化に伴う dislocation の空間構造形成は材料科学における根本問題であるのみならず、パターンダイナミクスの物理へ新たな題材を提供する。これは非常な難問ではあるが、ご興味を持たれた方には実験の論文をお勧めしたい。

6 おわりに

ここまで駆け足で dislocation の概念解説から始め、dislocation 単体のダイナミクスから障害物との相互作用、そして dislocation 多体系から発生するセル構造と加工硬化、というところまでみてきた。一見古い(斜陽の)題材でも、物理としては面白い問題をたくさん含んでいるということが伝われば嬉しいのだが、説明不足で意味が通らないところも多数あるに違いない。そのようなときは冒頭に掲げたメールアドレスまで問い合わせてください。喜んでお答えします。

謝辞

筆者が日本原子力研究所 PD 研究員時代に材料科学に踏み込むきっかけを与えてくれた蕪木英雄氏、また東北大学金属材料研究所在籍時代に同僚として筆者の愚問に丁寧につき合ってくれた、松井秀樹、佐藤裕樹、二田伸康の各氏にここで深い感謝の念を表したい。

参考文献

- [1] 鈴木秀次, 「転位論入門」, 裳華房
- [2] 鈴木平, 「転位のダイナミックスと塑性」, 裳華房
- [3] J. Friedel, *Dislocations*, (Pergamon Press, Oxford, 1964).
- [4] M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **56**, (1986), 889.
- [5] 長岡洋介, 安藤恒也, 高山一, 「局在・量子ホール効果・密度波」, 岩波書店 (第9章)
- [6] A. J. E. Foreman and M. J. Makin, Can. J. Phys. **45** (1967), 51;
Phil. Mag. **14** (1966), 911.
- [7] M. Cieplack and M. O. Robbins, Phys. Rev. B **41** (1990), 11508; Phys. Rev. Lett.
60 (1998), 2042.
- [8] T. Hatano and H. Matsui, cond-mat/0412697 (2004).
- [9] D. J. Bacon, Yu. N. Osetsky, J. Nucl. Mater. **329-333** (2004), 1233.
- [10] F. J. Humphreys, P. B. Hirsch, Phil. Mag. **318**, 73 (1970).
- [11] D. J. Bacon, U. F. Kocks, R. O. Scattergood, Phil. Mag. **28** (1973), 1241.
- [12] T. Hatano, Phys. Rev. Lett. **93** (2004), 085501.
- [13] M. Murayama et al., Scripta Mater. **41** (1999), 467.
- [14] I. Groma and B. Bakó, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 1487.